

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗОТОПНО-МОДИФИЦИРОВАННЫХ НАНОУГЛЕРОДНЫХ СТРУКТУР

Варламов И.А., Калиновский Ю.А.

Научный руководитель: Мышкин В.Ф. д.ф.-м.н., профессор  
Томский политехнический университет, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30  
e-mail: xxxxxxxx16@gmail.com

Нанотехнологии – ключевое понятие современности. Под нанотехнологиями понимается совокупность устройств и систем, методов и приемов, включающих целенаправленный контроль и управление строением, химическим составом и характером взаимодействия между составляющими элементами, имеющих нанометровый диапазон размеров. Нанотехнологии ориентированы как на улучшение свойств и характеристик объектов, так и получение принципиально новых материалов. Большие перспективы в электронике, материаловедении, медицине возлагаются на использование углеродных наноструктур: графен, фуллерен, нанотрубка. Большинство природных элементов представлены двумя и более изотопами, имеющими незначительное отличие большинства физико-химических свойств. При этом изотопы в чистом веществе могут быть распределены как равномерно, так и образовывать флуктуации концентрации (кластер). Теплофизические, электрофизические и механические свойства чистых материалов во многом зависят от вида распределения изотопов по их объему. Изучение изотопно-модифицированных материалов является одним из перспективных направлений в нанотехнологиях, что связано с возможностью формирования материалов, обладающих уникальными физико-химическими свойствами [1]. В настоящее время наблюдается тенденция к уменьшению размеров вычислительной техники и отображающих устройств. Например, создание плоских мониторов на основе графена. Создание излучающих структур возможно на основе полупроводникового графена. В работе [2] показано, что путем механического деформирования структуры графена возможно преобразовать проводящий графен в полупроводниковый. Для этого можно использовать отличие длины связей между двумя легкими и двумя тяжелыми изотопами углерода. Это позволит показать перспективность изотопного материаловедения в области применения углеродных наноструктур. Получение чистых материалов и изучение изменения их свойств при изотопном замещении технически очень сложная задача. Поэтому цель исследования – компьютерное моделирование влияния изотопного состава на различные параметры углеродных наноструктур. В настоящее время разработано и используются множество программ для моделирования молекулярных структур [3,4]. Большинство из них снабжено базой данных по строению атомов различных элементов, например, HyperChem. Для моделирования с помощью HyperChem необходимо лишь указать выбранный элемент и вид гибридизации. Однако в HyperChem не предусмотрена возможность замены изотопов для большинства элементов. Программа квантово-химического моделирования Gaussian требует указания координат атомов, входящих в молекулу, вид гибридизации и позволяет устанавливать массу атомов. Для моделирования изотопных наноструктур нами использовались две указанные лицензионные программы совместно. Вначале выстраивали и оптимизировали структуру графена в программе HyperChem в виде сетки 10×10 углеродных атомов. Из результатов работы HyperChem координаты атомов переносили в программу Gaussian. Изменяли для части атомов атомную массу и запускали работу программы. При этом рассматривались как однослойные, так и двуслойные графеновые слои. В докладе приводятся результаты определения с помощью пакетов квантово-химического моделирования длин связей между атомами в изотопно-модифицированном графене. Получена карта распределения  $^{13}\text{C}$  для формирования запрещенной зоны, превращающей графен в полупроводник. В работе показано, что изотопное замещение углерода позволяет изменять длину связи, ширину запрещенной зоны и спектр колебательных частот.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Р. Келсалл, А. Хэмли, М. Геогеган (ред.) Научные основы нанотехнологий и новые приборы. Учебник-монография. Пер. с англ.: Научное издание / Р. Келсалл, А. Хэмли, М. Геогеган (ред.) — Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2011. – 528 с.
2. Zh.H. Ni, T. Yu, Y.H. Lu, et al., Uniaxial strain on graphene: Raman spectroscopy study and band - gap opening, ACS Nano, 3, 2009. – С. 483 – 492.
3. Квантовохимическое моделирование процесса синтеза фрагментов структуры аналогов гуминовых веществ / М. А. Пошелюжная [и др.]. // Журнал общей химии. - 2014. - Т. 84 (146), вып. 5. - С. 755-760. - Библиогр.: с. 760. - ISSN 0044-460X.
4. Цышевский Р.В., Гарифзянова Г.Г., Храпковский Г.М. Квантово-химические расчет механизмов химических реакций. Учебно-методическое пособие. — Казань: КНИТУ, 2012. — 87 с.